

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ПДС 0200.006
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ ИМЕНИ
П. ЛУМУМБЫ» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 20.10.2023, протокол № 22

О присуждении Чулуунбаатару Галмандаху, гражданину Монголии, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «**Вычислительные схемы решения квантово-механических задач**» по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ в виде рукописи принята к защите 23 июня 2023 г., протокол № 13 диссертационным советом ПДС 0200.006 Федерального государственного автономного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д.6.; приказ от 24 октября 2022 года № 599).

Соискатель Чулуунбаатар Галмандах 1993 года рождения, в 2019 году окончил магистратуру Российского университета дружбы народов с присуждением квалификации «магистр» по направлению «Прикладная математика и информатика».

С 23.09.2019 по 23.09.2023 гг. обучался в очной аспирантуре РУДН по программе подготовки научно-педагогических кадров по направлению 09.06.01 – «Информатика и вычислительная техника» профиль «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», соответствующему научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, по которой подготовлена диссертация.

В настоящее время не работает.

Диссертация выполнена на кафедре Прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук Федерального государственного автономного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Севастьянов Леонид Антонович, профессор кафедры Прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук РУДН.

Официальные оппоненты:

1. **Ланеев Евгений Борисович**, гражданин РФ, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), профессор, профессор Математического института им. С.М. Никольского ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов им. П. Лумумбы»;
2. **Цирулев Александр Николаевич**, гражданин РФ, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), доцент, профессор кафедры общей математики и математической физики ФГАОУ ВО «Тверской государственный университет»;
3. **Мележик Владимир Степанович**, гражданин РФ, доктор физико-математических наук (специальность 01.04.02 – Теоретическая физика), старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединённого института ядерных исследований.

В заключение отзывов оппонентов указано, что диссертационная работа полностью соответствует п.2.2 раздела II Положения о присуждении учёных степеней в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы», утверждённого Ученым советом РУДН, протокол № 12 от 23.09.2019 г., а ее автор, Чулуунбаатар Галмандах, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ по теме диссертации, из них 5 работ в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в международной базе данных Scopus/Web of Science, 1 программа INQSIM в библиотеке программ ОИЯИ. Общий объем публикаций 5,9 п.л. Авторский вклад 82 %.

Наиболее значимые публикации

- в изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus:
1. O. Chuluunbaatar, B.B. Joulakian, G. Chuluunbaatar, J. Buša Jr., G.O. Koshcheev, Accurate calculations for the Dirac electron in the field of twocenter Coulomb field: Application to heavy ions, Chem. Phys. Lett. 784, pp. 139099–1–9 (2021).
 2. V.L. Derbov, G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, I. Filikhin, A.V. Mitin, Spectrum of beryllium dimer in ground $X^1\Sigma_g^+$ state, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 262, pp. 107529–1–10 (2021).

3. G. Chuluunbaatar, A. Gusev, V. Derbov, S. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V. Gerdt, A Maple implementation of the finite element method for solving boundary-value problems for systems of second-order ordinary differential equations, Communications in Computer and Information Science 1414, pp. 152–166 (2021).
4. G. Chuluunbaatar, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, PI-type fully symmetric quadrature rules on the 3-, . . . , 6-simplexes, Computers & Mathematics with Applications 124, pp. 89–97 (2022).
5. V. P. Gerdt, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, V.L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy Symbolic-Numerical Algorithms for Solving Elliptic Boundary-Value Problems Using Multivariate Simplex Lagrange Elements \\\ Lecture Notes in Computer Science 11077, pp. 197–213 (2018).
- в изданиях из списков РУДН и ВАК РФ:
6. М.Д. Малых, Л.А. Севастьянов, Г. Чулуунбаатар, О применении программного обеспечения KANTBP к задаче дифракции в волноводе, Физические основы приборостроения 11, сс. 74–79 (2022).
- программа INQSIM в библиотеке программ ОИЯИ.
7. Г. Чулуунбаатар, О. Чулуунбаатар, А.А. Гусев, С.И. Виницкий, INQSIM: программа преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-, . . . , 6-симплексах из компактного вида в развернутый, Библиотека программ ОИЯИ (2022). <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/inqsim/indexe.html>

На автореферат диссертации поступили положительные, не содержащие критических замечаний отзывы, от:

- **Земляной Елены Валерьевны**, гражданки РФ, доктора физико-математических наук (специальность 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»), начальника сектора №4 расчетов сложных физических систем Научного отдела вычислительной физики Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова Объединённого института ядерных исследований. В отзыве дана положительная оценка диссертации. Отмечена теоретическая и практическая значимость методов и вычислительных схем, представленных в диссертационном исследовании. Замечаний нет.

- **Блинкова Юрия Анатольевича**, гражданина РФ, доктора физико-математических наук (специальность 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»), доцента, заведующего кафедрой математического и компьютерного моделирования Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского. В отзыве дана характеристика

решаемых в работе задач и отмечена актуальность темы диссертационного исследования. Замечаний нет.

• **Дивакова Дмитрия Валентиновича**, гражданина РФ, кандидата физико-математических наук (специальность 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»), доцента кафедры математического моделирования и искусственного интеллекта Российского университета дружбы народов им. П. Лумумбы. В отзыве дана положительная оценка диссертационной работы и отмечена практическая значимость полученных результатов. Замечаний нет.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их высокой квалификацией, наличием научных трудов и публикаций, соответствующих теме оппонируемой диссертации.

Ланеев Евгений Борисович является крупным специалистом в области математического моделирования. В сфере его научных интересов находятся численные методы решения некорректных обратных задач методом Тихоновской регуляризации, в том числе разработка эффективных методов математической обработки данных в термографии и гравиразведке и других прикладных областях на основе концепции аналитического продолжения гармонических функций с целью восстановления внутренней структуры объектов по косвенным данным. Основные публикации Ланеева Е.Б. по тематике диссертационного исследования:

1. E.V. Laneev, E.Yu. Ponomarenko, On a linear inverse potential problem with approximate data on the potential field on an approximately given surface, *Eurasian Math. J.* 14:1, pp. 55–70 (2023).
2. Е.Б. Ланеев, В.А. Анисимов, П.А. Лесик, В.И. Ремезова, А.А. Романов, А.Г. Хегай, Об одной некорректно поставленной краевой задаче для метагармонического уравнения в круговом цилиндре, *Вестник российских университетов. Математика* 26:136, сс. 394–403 (2021).
3. Е.Б. Ланеев, Д.Ю. Быков, А.В. Зубаренко, О.Н. Куликова, Д.А. Морозова, Е.В. Шунин, Об одной некорректно поставленной краевой задаче для уравнения Лапласа в круговом цилиндре, *Вестник российских университетов. Математика* 26:133, сс. 35–43 (2021).
4. Е.Б. Ланеев, П.А. Лесик, А.В. Климишин, А.М. Котюков, А.А. Романов, А.Г. Хегай, Об устойчивом приближенном решении одной некорректно поставленной краевой задачи для метагармонического уравнения, *Вестник российских университетов. Математика* 25:130, сс. 156–164 (2020).
5. Е.Б. Ланеев, Н.Ю. Черникова, Задача сравнения пространственной структуры молекул на основе минимизации функции сравнения, *Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физ.* 59:1, сс. 135–142 (2019).

Цирулев Александр Николаевич является крупным специалистом в области математического моделирования гравитирующих систем, к которой относится разработка новых численных методов исследования задачи многих тел. Основные публикации Цирулева А.Н. по тематике диссертационного исследования:

1. I.M. Potashov, Ju.V. Tchamarina and A.N. Tsirulev, Bound orbits near scalar field naked singularities, *The European Physical Journal C* 79:709, 9pp (2019).
2. I.M. Potashov, Ju.V. Tchamarina and A.N. Tsirulev, Bound orbits near black holes with scalar hair, *Journal of Physics: Conference Series* 1390, pp. 012097–1–6 (2019).
3. Ju.V. Tchamarina, E.G. Alekseeva, A.N. Tsirulev and N.K. Nuraliev, Nonstationary self-gravitating configurations of scalar and electromagnetic fields, *Journal of Physics: Conference Series* 1390, pp. 012099–1–6 (2019).
4. I.M. Potashov, Ju.V. Tchamarina and A.N. Tsirulev, Geodesic motion near self-gravitating scalar field configurations, *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science* 27:3, pp. 231–241 (2019).

Мележик Владимир Степанович является крупным специалистом в области квантовой физики и вычислительной математики, в сфере его научных интересов находятся квантовые расчеты малочастичных атомных систем и процессов, что является одним из важных аспектов диссертационного исследования соискателя.

Основные публикации Мележика В.С. по тематике диссертационного исследования:

1. V.S. Melezhik, Improving efficiency of sympathetic cooling in atom-ion and atom-atom confined collisions, *Phys. Rev. A* 103, pp. 053109–1–13 (2021).
2. S. Shadmehri, S. Saeidian, and V.S. Melezhik, 2D nondirect product discrete variable representation for Schrodinger equation with nonseparable angular variables, *J. Phys. B* 53, pp. 085001–1–7 (2020).
3. V.S. Melezhik, Efficient computational scheme for ion dynamics in RF-field of Paul trap, *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science* 27:4, pp. 378–385 (2019).
4. V.S. Melezhik, Zb. Idziaszek, and A. Negretti, Impact of ion motion on atom-ion confinement-induced resonances in hybrid traps, *Phys. Rev. A* 100, pp. 063406–1–12 (2019).
5. S. Shadmehri and V.S. Melezhik, Confinement-induced resonances in two-center problem via a pseudopotential approach, *Phys. Rev. A* 99, pp. 032705–1–11 (2019).

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– разработаны и реализованы в виде комплексов программ

- вычислительная схема непрерывной минимаксной оптимизации нелинейных функционалов,
- вариационный метод непрерывной минимаксной оптимизации для уравнения Дирака электрона в поле двух тяжелых ионов,
- метод конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка,
- модифицированный метод Левенберга-Марквардта решения систем большого числа нелинейных алгебраических уравнений высокого порядка с выпуклыми ограничениями.

– получены полностью симметричные квадратурные формулы высокого порядка на симплексах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- разработанная новая итерационная схема, основанная на методах минимизации и непрерывного минимакса ньютоновского типа в сочетании с методами отрицательного направления кривизны для невыпукло-невогнутого, выпукло-невогнутого и невыпукло-вогнутого случаев, применимая для решения широкого класса непрерывных минимаксных оптимизационных задач в различных предметных областях,
- полученные оценки спектра вещественных собственных значений энергии при нулевых и ненулевых значениях углового момента двухатомной молекулы бериллия и комплексных собственных значений энергии метастабильных состояний этой молекулы полезны для интерпретации и планирования дальнейших экспериментов.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов)

– использованы

- модифицированные методы ньютоновского типа,
- метод конечных элементов,
- модифицированные методы Левенберга-Марквардта,
- инструментарий компьютерной алгебры, реализованный в системе Maple, и язык программирования Fortran.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- программу INQSIM и уже вычисленные с её помощью квадратурные формулы (т.е. значения весов и узлов) можно использовать при решении многомерных (вплоть до 6-мерных) краевых задач методом конечных элементов в различных предметных областях.
- реализованная схема вариационного метода решения двухцентральной кулоновской задачи для уравнения Дирака обеспечивает обоснованные и надежные оценки собственных значений энергии и собственных функций,

необходимые для интерпретации экспериментов с тяжелыми ионами.

- построенная вычислительная схема решения краевых задач рассеяния с запутанными открытыми каналами уже нашла свое применение для правильной интерпретации поведения измеренных в экспериментах сечений подбарьерного слияния тяжелых ионов

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

– установлено

- качественное и количественное совпадение авторских результатов с результатами других авторов и с теоретическими оценками,
- корректность и полнота публикаций доказательств всех полученных результатов в рецензируемых журналах,

– использованы строгие математические методы: модифицированные методы ньютоновского типа, метод конечных элементов, модифицированные методы Левенберга-Марквардта.

Личный вклад соискателя состоит в том, что Чулуунбаатар Галмандах, работая в коллективе соавторов, самостоятельно разработал все численные и символьные компьютерно-алгебраические алгоритмы и создал реализующие их комплексы программ, а также тесты, представленные в диссертации. Его вклад в разработку компьютерного моделирования и анализ конкретных численных экспериментов является определяющим.

Диссертационное исследование Чулуунбаатара Галмандаха является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена актуальная задача построения высокоточных вычислительных схем вариационного метода и метода конечных элементов для решения квантовомеханических задач.

Заключение диссертационного совета подготовлено доктором физико-математических наук, и.о. заведующего кафедрой математического моделирования и искусственного интеллекта факультета физико-математических и естественных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» М.Д. Малых, доктором физико-математических наук, профессором, главным научным сотрудником федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской Академии Наук О.В. Дружининой; доктором физико-математических наук, профессором, профессором Института физических исследований и технологий факультета физико-математических и естественных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» Ю.П. Рыбаковым.

На заседании 20 октября 2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Чулуунбаатару Галмандаху ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 13, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председательствующий на заседании:

Заместитель председателя диссертационного совета ПДС 0200.006, доктор физико-математических наук, профессор

Ученый секретарь диссертационного совета ПДС 0200.006, кандидат физико-математических наук, доцент



Кулябов Д.С.

Демидова А.В.

«20» октября 2023 г.